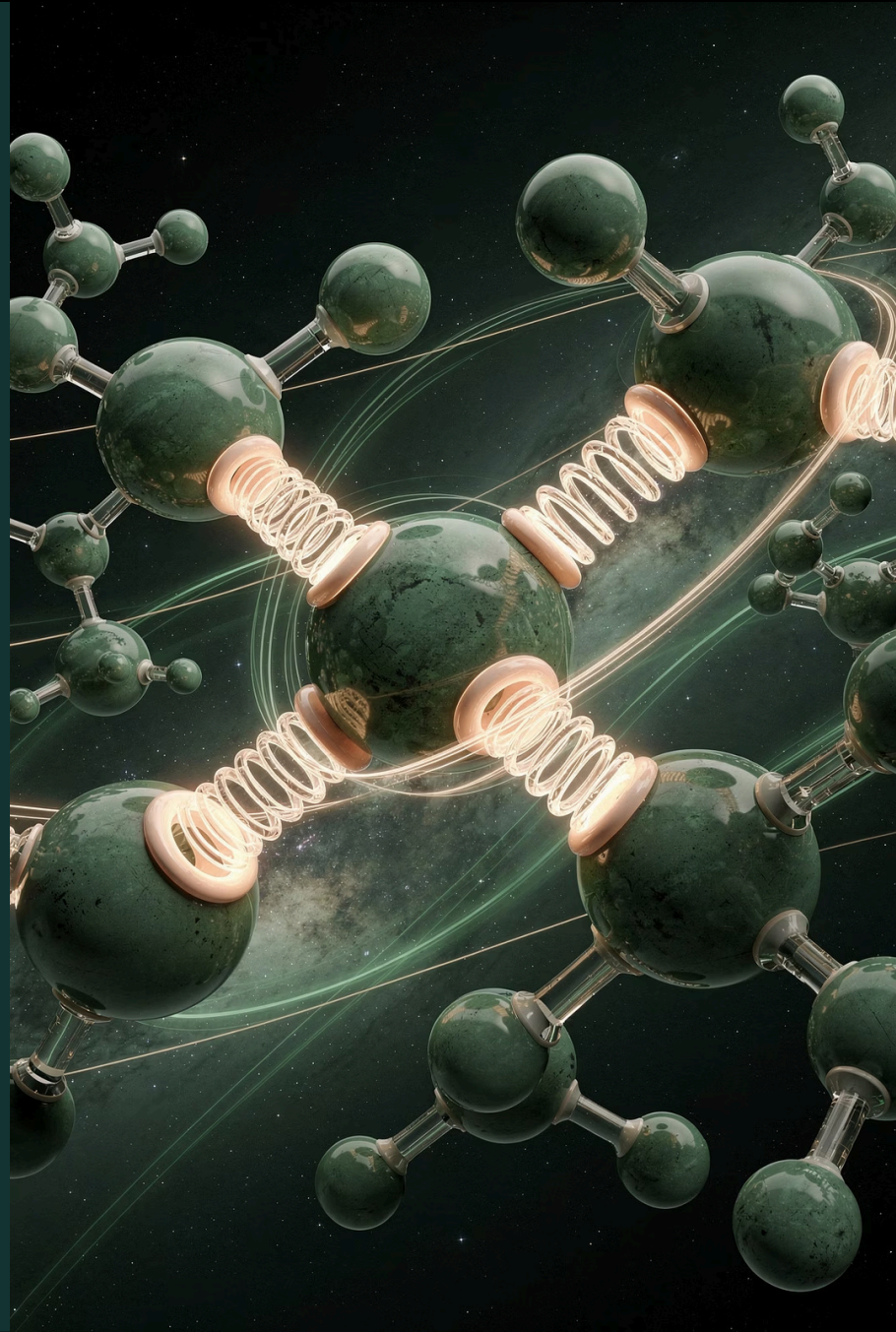
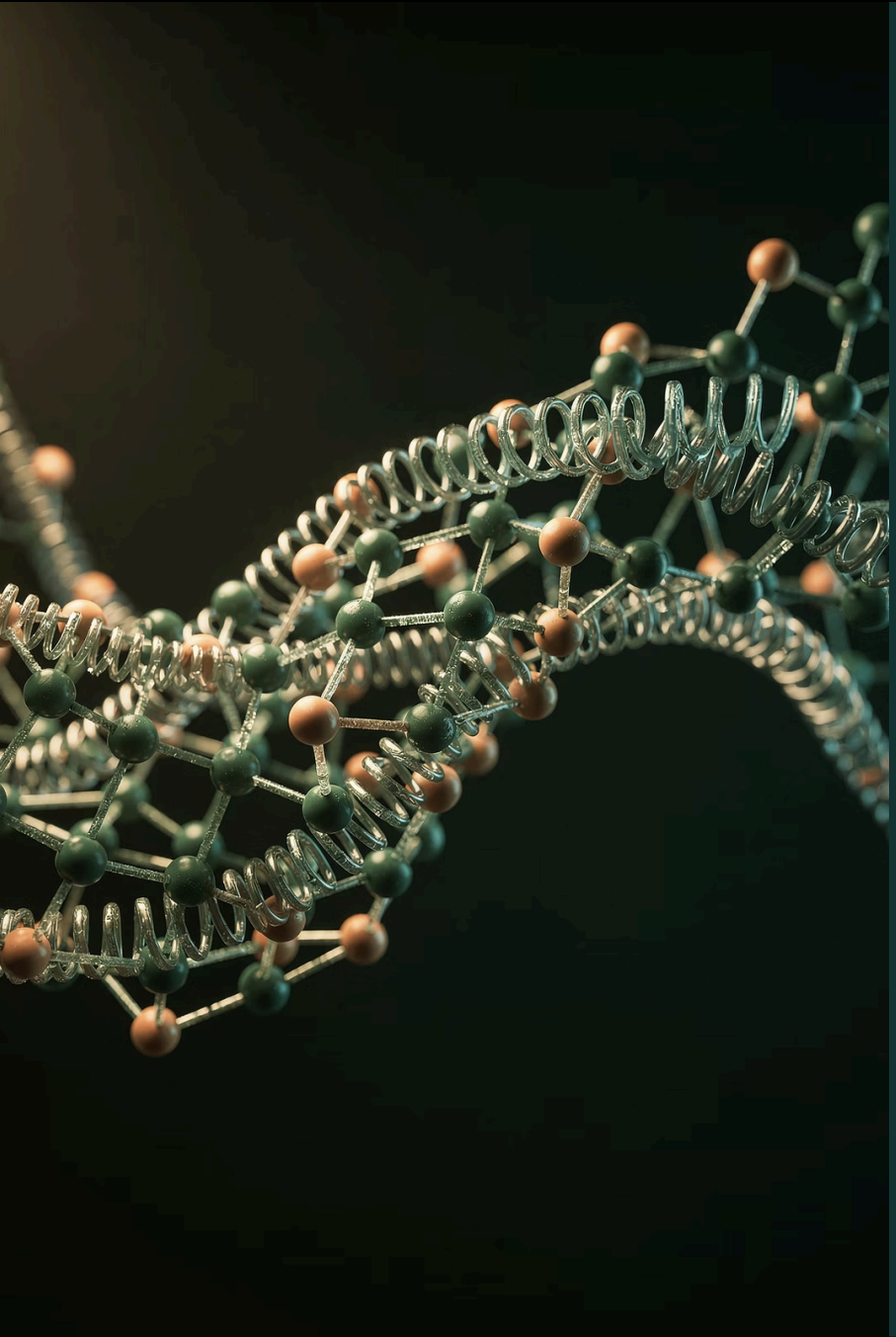
Maddenin Görünmez Alfabesi: İnfrared Spektroskopisi

Ders Sunumu

TERADİGMA





Atomlar Neden Titreşir?

Kimyasal bağlar, ders kitaplarındaki gibi katı ve hareketsiz çubuklar değildir.

Esnek Yay Modeli

Her bağ, ucundaki atomların kütlesine ve bağ kuvvetine göre belirlenmiş bir frekansta sürekli titreşen **esnek bir yay** gibi tanzim edilmiştir.

Evrensel Matematiksel Düzen

Bu titreşimler rastgele değil; matematiksel olarak sabit, evrensel ve şaşmaz frekanslardadır.

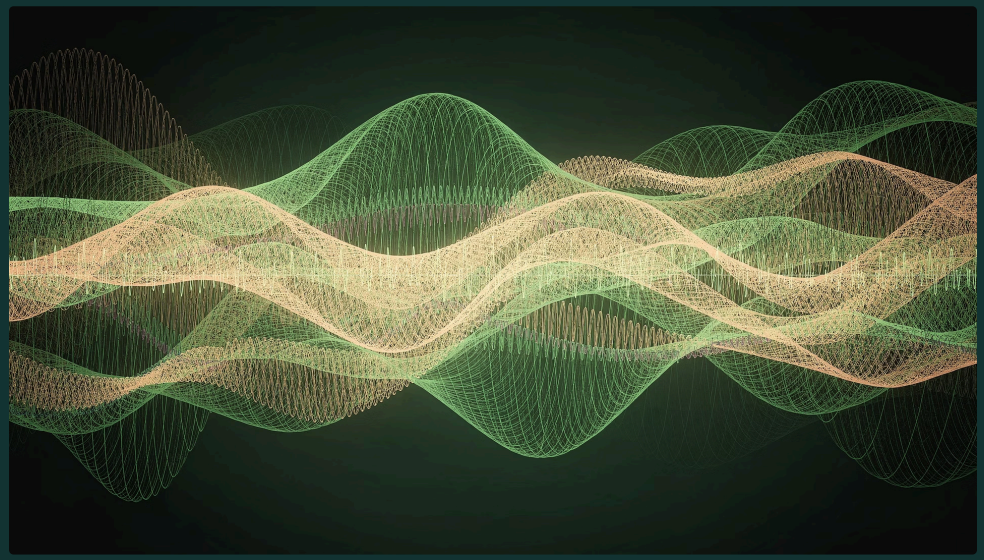
Kimliğin Okunması

IR Spektroskopisi, bu titreşimleri okuyarak molekülün kimliğini ortaya koyar.

> "Görünmez atomlar, bir müzik enstrümanının telleri gibi belirli ve evrensel notalarda titreşmek üzere ayarlanmıştır."

Hooke Yasası: Titreşimin Matematiği

Moleküllerin titreşim frekansı şu formülle ifade edilir:



$$\nu = (1 / 2\pi c) \cdot \sqrt{(k / \mu)}$$

ν — Titreşim Frekansı

Dalga sayısı (cm^{-1}); molekülün "ses tonu"

k — Kuvvet Sabiti

Bağın sertliği

μ — İndirgenmiş Kütle

$\mu = (m1 \cdot m2) / (m1 + m2)$

Bağ Kuvveti Frekansı Nasıl Belirler?

k (kuvvet sabiti) arttıkça frekans artar — tıpkı gitarın teli gerildikçe sesin tizleşmesi gibi.

Tekli Bağlar (C–C)

En gevşek yay → ~1200 cm^{-1}

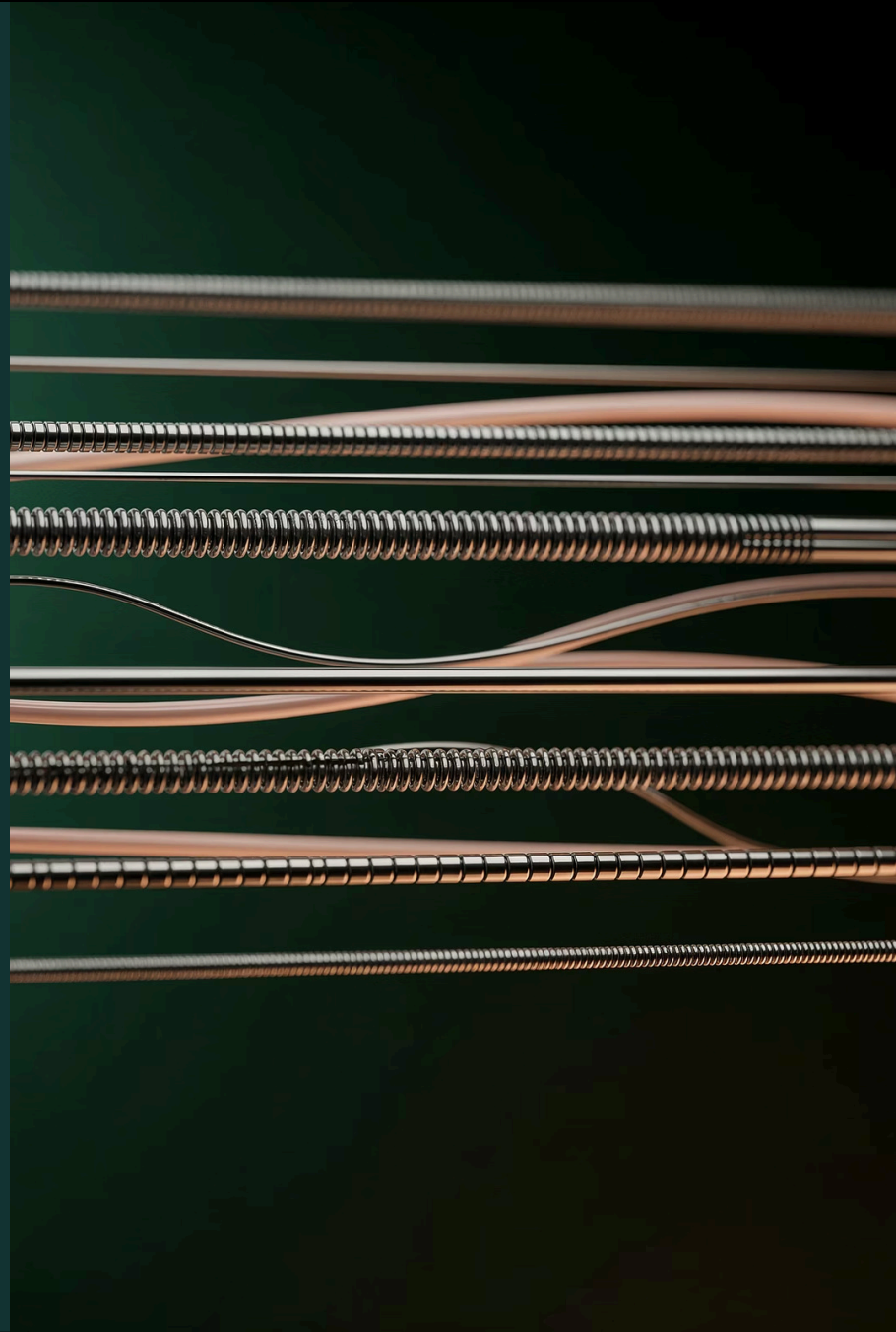
İkili Bağlar (C=C)

Orta sertlik → ~1650 cm^{-1}

Üçlü Bağlar (C≡C)

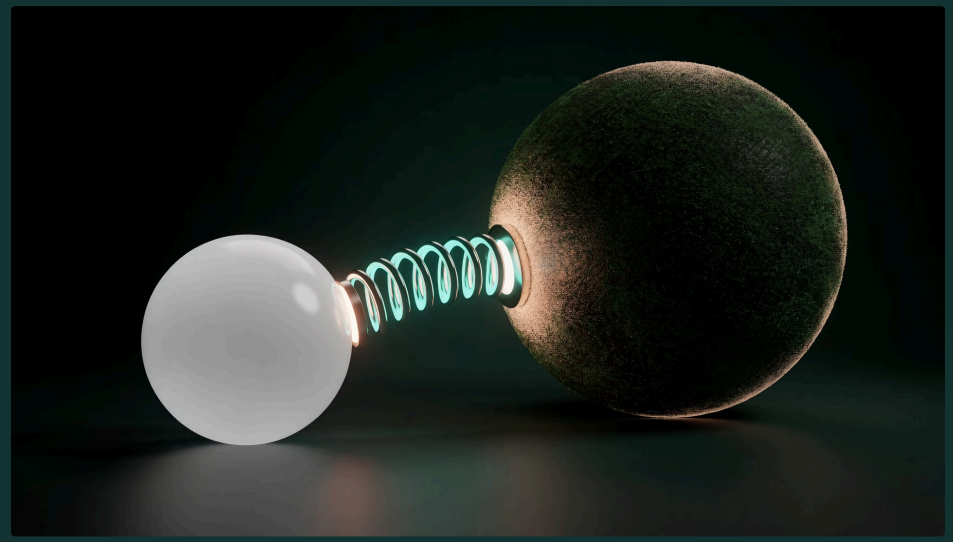
En sert yay → ~2150 cm^{-1}

Evrenin neresinde olursa olsun, üçlü bağ ikili bağdan daha hızlı titreşir — madde, değişmez bir kanuna tabi kılınmıştır.



Kütle Frekansı Nasıl Etkiler?

μ (indirgenmiş kütle) arttıkça atalet artar ve titreşim yavaşlar.



> Felsefi not: Şuursuz bir atom, kütle ve kuvvet sabitine dayalı evrensel bir matematiğe nasıl bu kadar eksiksiz itaat eder?

1

C–H Bağı

Hidrojen evrenin en hafif atomudur → ~3000 cm^{-1} (yüksek frekans)

2

C–Cl, C–Br Bağları

Ağır atomlar çok daha hantal hareket eder → 600–800 cm^{-1} (düşük frekans)

Kuantum Kuralı: Dipol Moment Değişimi

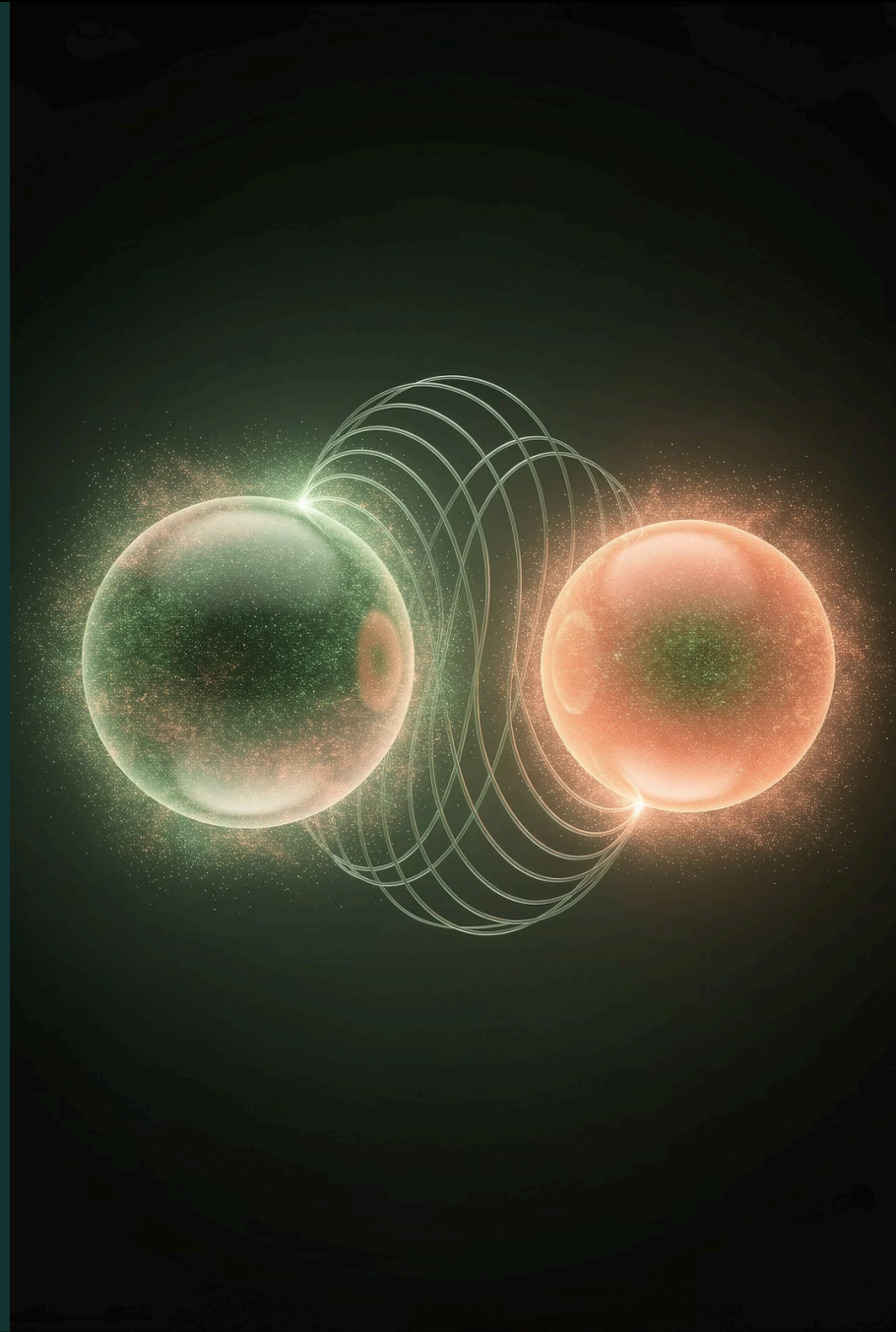
Bir bağın IR ışığını soğurabilmesi için yalnızca frekans uyumu yetmez — titreşim sırasında **elektriksel yük dağılımının değişmesi** şart koşulmuştur.

IR İnaktif

Bu değişim gerçekleşmiyorsa molekül "IR inaktif"tir: ışık içinden geçip gider.

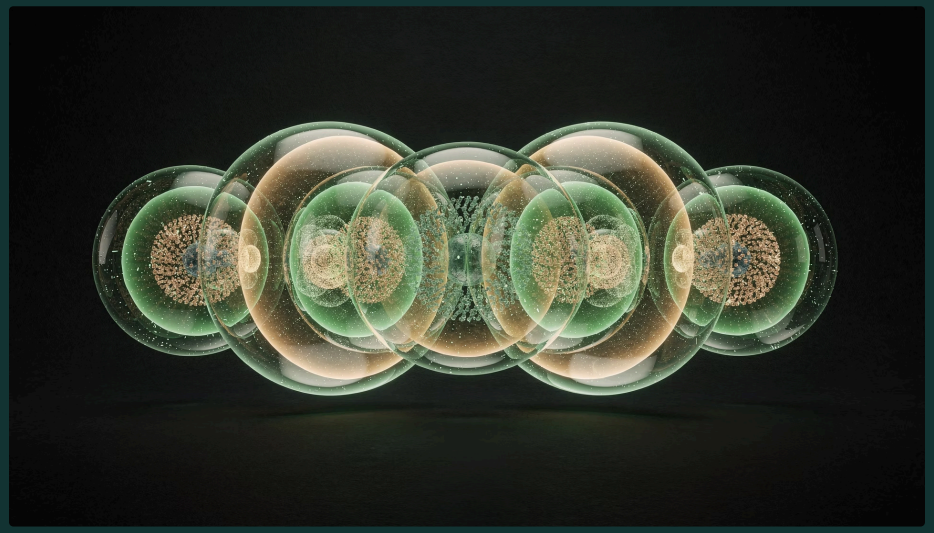
IR Aktif

Bu değişim gerçekleşiyorsa molekül "IR aktif"tir: ışığı soğurur ve sinyal verir.



Atmosferde İnce Ayar

Bu kuantum kuralı, atmosferik dengenin korunmasında hayati bir rol üstlenmektedir.



N_2 ve O_2 — Atmosferin %99'u

Simetrik yapıları nedeniyle IR inaktiftir — ısıyı tutmazlar, geçirirler.

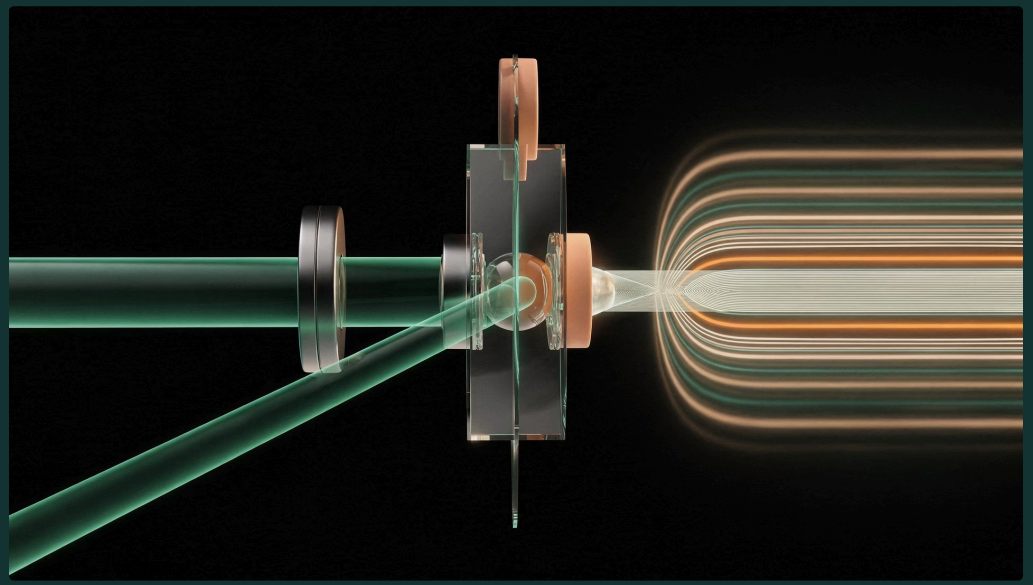
H_2O ve CO_2 — %1'den Az

Asimetrik yapıları sayesinde IR aktiftir — yeryüzünün ısısını bir battaniye gibi tutarak donmayı engellerler.

Simetrik olanın şeffaf, asimetrik olanın tutucu kılınması; kör tesadüfle açıklanamayacak bir hassas tercih işaretidir.

FTIR: Karmaşadan Doğan Berraklık

Eski yöntemde her dalga boyu tek tek numuneye gönderilirdi — yavaş ve verimsiz.



1

Eski Yöntem

Her dalga boyu tek tek numuneye gönderilirdi — yavaş ve verimsiz.

2

Modern FTIR

Michelson İnterferometresi kullanılır: tüm frekansları içeren ışık demetinin tamamı *aynı anda* moleküle gönderilir ve oluşan karmaşık sinyal kaydedilir.

Fourier Dönüşümü: Sinyalin Çözülmesi

Kaydedilen karmaşık sinyal, **Fourier Dönüşümü** adlı matematiksel işlemle ayrıştırılır.

01

Karmaşık Sinyal

Tüm frekansların üst üste binmesiyle oluşan interferogram kaydedilir.

02

Matematiksel Ayrıştırma

Tıpkı usta bir müzisyenin karmaşık bir akordan tek tek notaları ayırt etmesi gibi, iç içe geçmiş tüm titreşimler ayrıştırılır.

03

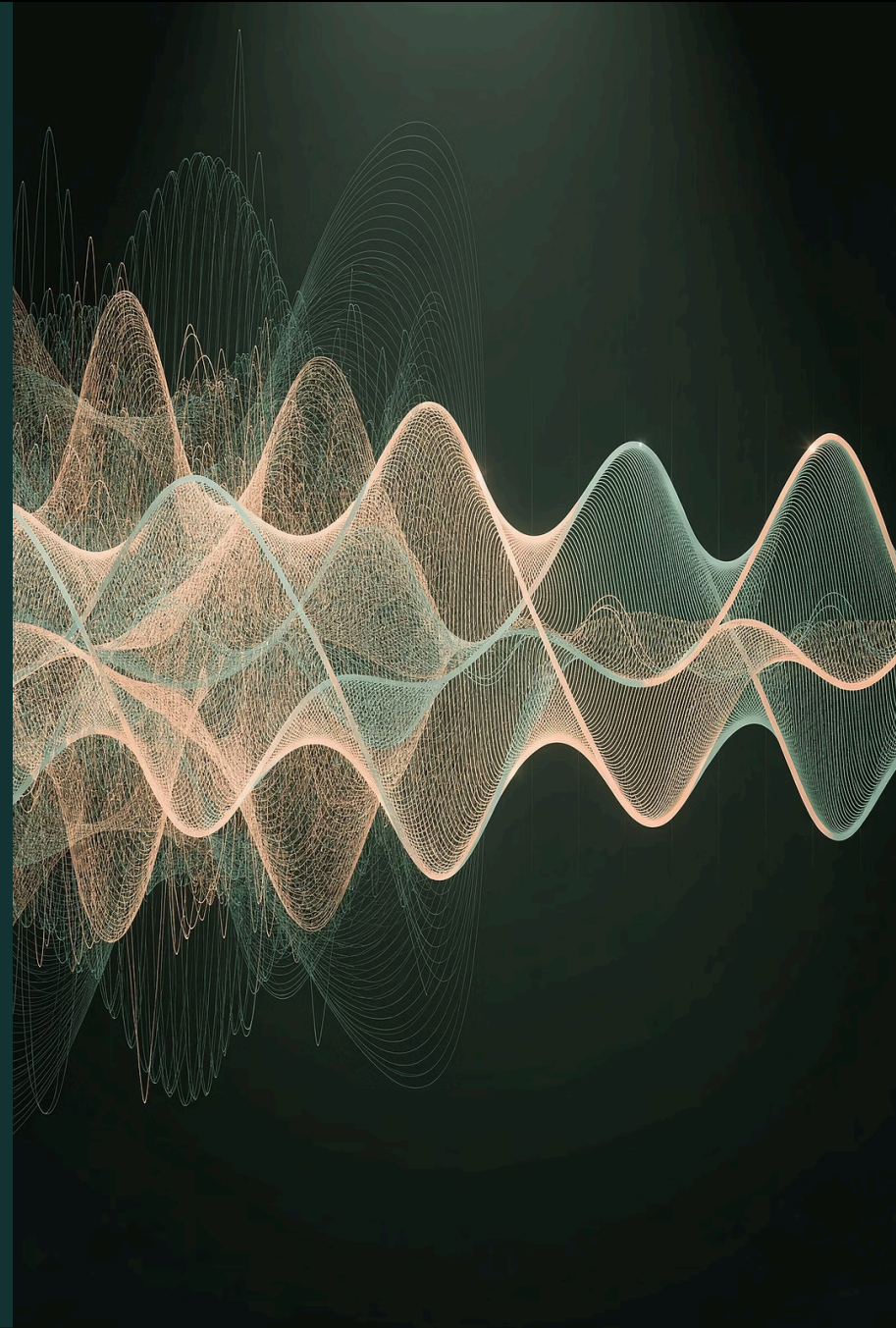
Frekans Spektrumu

Net ve okunabilir bir **frekans spektrumuna** dönüştürülür.

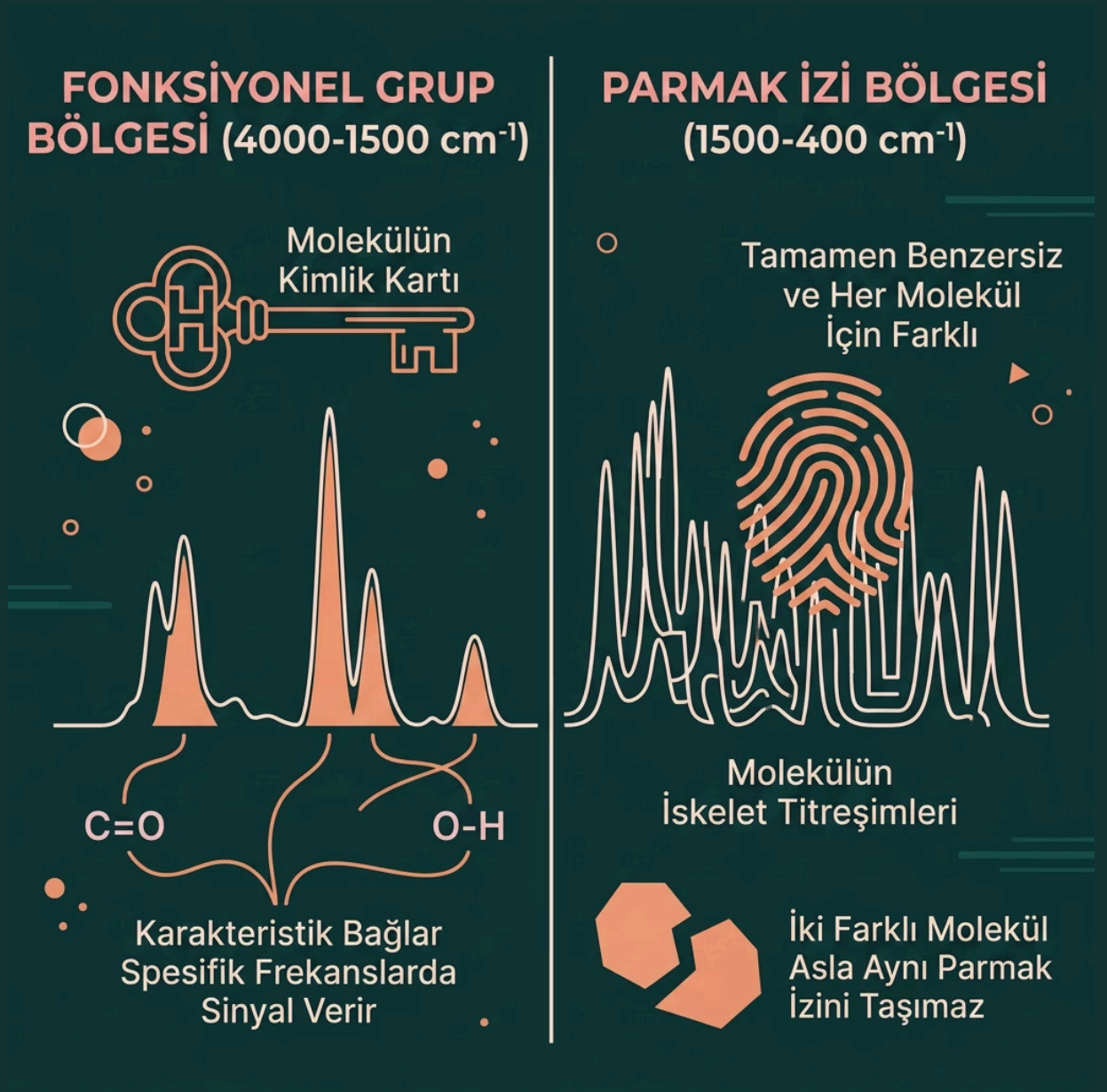
04

Parmak İzi Grafiği

Sonuç: molekülün eşsiz "parmak izi" grafiği ortaya çıkar.



Spektrumun İki Bölgesi



Fonksiyonel Grup Bölgesi

4000–1500 cm⁻¹: Molekülün kimlik kartı; karakteristik bağlar spesifik frekanslarda sinyal verir.

Parmak İzi Bölgesi

1500–400 cm⁻¹: Molekülün iskelet titreşimleri; her molekül için tamamen benzersizdir — iki farklı molekül asla aynı parmak izini taşımaz.

Fonksiyonel Grup Bölgesinin Haritası

3600–2700 cm^{-1}

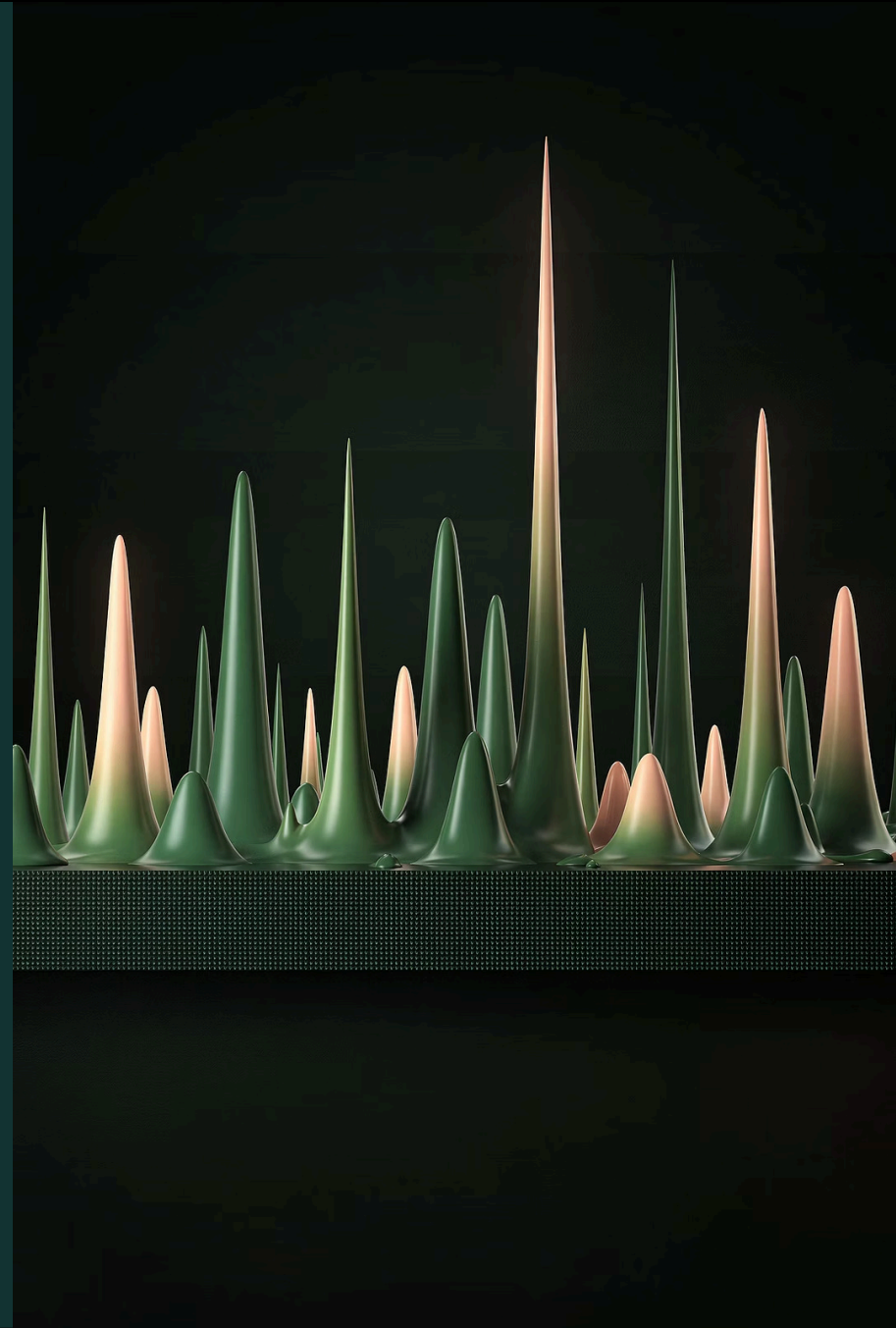
O-H, N-H, C-H bağları; O-H geniş ve yayvan bandıyla kendini belli eder.

2300–2100 cm^{-1}

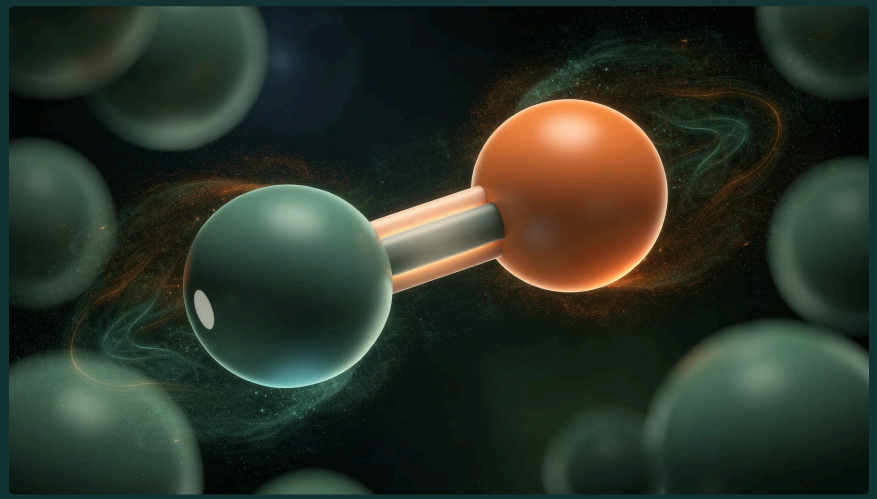
C≡C ve C≡N gibi üçlü bağların sessiz bölgesi.

~1700 cm^{-1}

Karbonil grubu (C=O) — çok keskin ve şiddetli piğiyle "spektrumun kralı".



Evrensel Standartlaşma



- Bir karbonil grubu (C=O); insan DNA'sında, elma kabuğundaki selülozda veya laboratuvarda sentezlenen bir ilaçta olsun — daima ~1700 cm^{-1}'de titreşmek üzere ayarlanmıştır.

→ Bu standart, zamanla, mekanla veya ortamla değişmez.

→ Enzimler substratlarını, hormonlar reseptörlerini bu standart titreşimler sayesinde tanır.

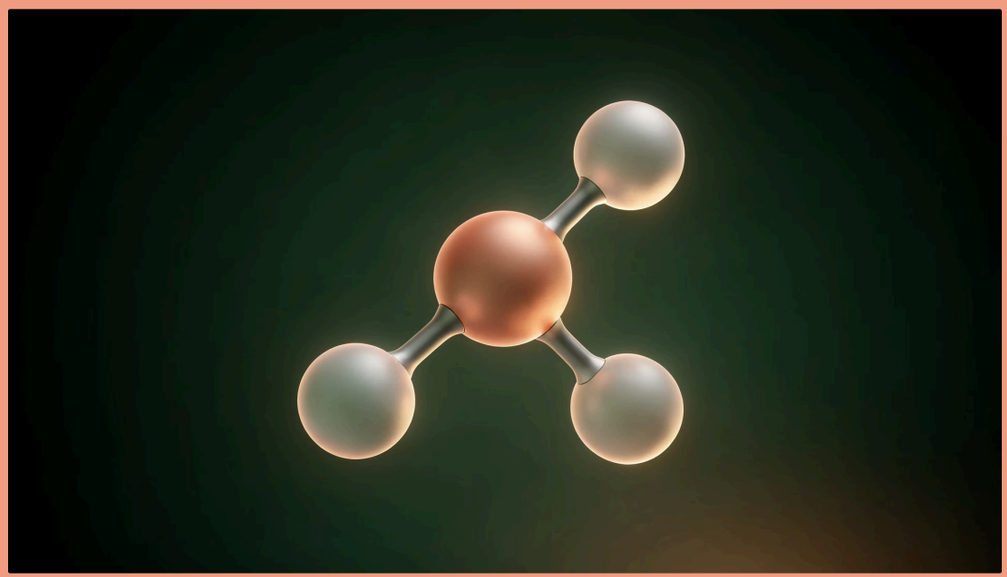
→ Bu "evrensel üretim standardı" olmasaydı, biyolojik yaşamın sürdürülmesi imkânsız hale gelirdi.

İzomerlerin Şahitliği: Aynı Hammadde, Farklı Sanat

Etanol ve **Dimetil Eter** atomik olarak birebir aynıdır: ikisinde de C2H6O.

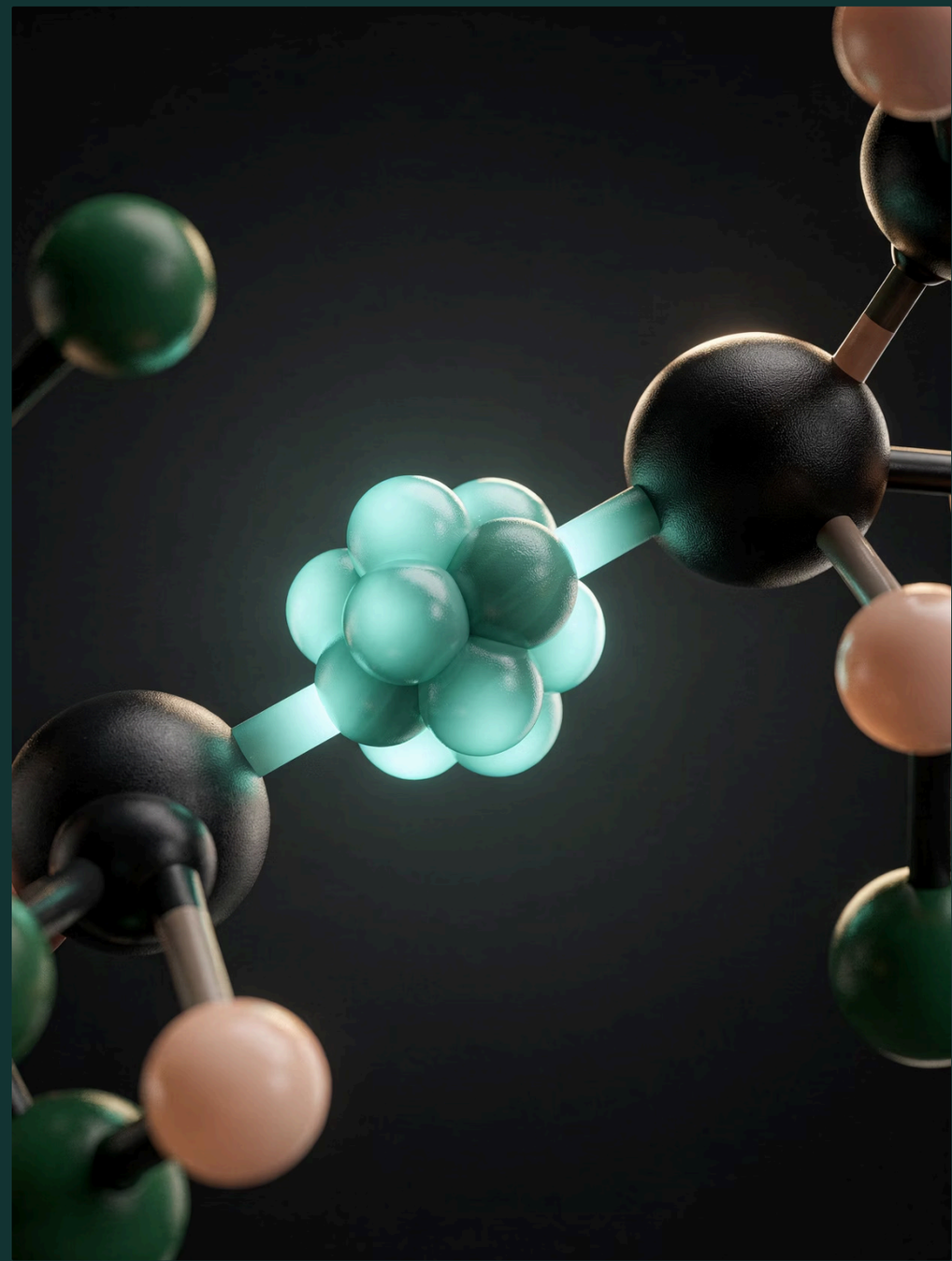
Etanol

Oksijen bir hidrojenle bağlandırılmıştır → O-H bandı 3300 cm^{-1}'de belirgin; sıvı, suda çözünür.



Dimetil Eter

Oksijen iki karbon arasına (C-O-C) yerleştirilmiştir → O-H bandı tamamen yoktur; oda sıcaklığında gaz, anestezik etkili.



Aynı atomlardan tamamen zıt özellikler — özellikler atomun içinde değil, atomların **konumlandırılışında** saklıdır.

Dersin Özeti: Spektrumun Söylediği

IR spektroskopisi, maddenin yalnızca "nasıl" işlediğini değil, bu işleyişin arkasındaki planlı mimariyi de gözler önüne serer.

Evrensel Titreşim Düzeni

Her bağ, Hooke yasasına göre sabit ve evrensel bir frekansta titreşmek üzere **ayarlanmıştır**.

Atmosfer Dengesi

Dipol moment kuralı, atmosfer dengesini ve yaşamı koruyacak şekilde **tayin edilmiştir**.

Konumlandırma Planı

Aynı atomlardan izomerlerin farklı özellikler sergilemesi, özelliklerin **konumlandırma planında** saklı olduğunu gösterir.

Tasarımın İşareti

Spektrumdaki her keskin pik, maddenin kör bir kaosun değil; ilim, irade ve kudret sahibi bir tasarımın ürünü olduğuna işaret eder.